



アドバンス・シミュレーション・ニュース No.10 (2024年2月22日発行)

第10回アドバンス・シミュレーション・セミナー2023 開催報告

筑波大学 数理物質系 教授 岡田 晋 様

「計算物質科学による 2.5 次元物質科学研究：原子層物質複合構造体と外場」

アドバンス・シミュレーション・ニュースは、アドバンスソフト株式会社が2021年度から、我が国における計算科学技術の振興を目的として、幅広い分野の最先端研究を対象として開催している「アドバンス・シミュレーション・セミナー」の開催報告と今後の開催予定をご案内するサービスです。

本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに、企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がること等を期待しています。

開催概要

- 日時：2023年12月15日（金）14:00～15:30
- 開催方法：オンラインセミナー（Zoomにて開催）
- 主催：アドバンスソフト株式会社 出版事業部
- 講演概要

原子層物質は多様な複合構造／高次構造を構築することが可能です。特に、弱い面間相互作用を介した積層複合構造では、これまでの原子間の化学結合基礎をおいた物質科学では見ることのできない、全く新しい現象の発現がみられます。このような、原子層物質からなる複合構造体は、近年、「2.5次元物質」として注目されています。



本講演では計算物質科学の観点から、2.5次元物質科学のコンセプトの説明と、0.5次元が誘起する種々のユニークな物性現象について紹介する予定です。

ご講演内容

本稿は、2023年12月15日に開催した「アドバンス・シミュレーション・セミナー2023」において、岡田 晋 様にご講演いただいた内容をアドバンスソフトがまとめたものです。

1. 講演内容

1.1. はじめに

アドバンス・シミュレーション・セミナー2023の第10回では筑波大学数理物質系・教授の岡田先生より、「計算物質科学による 2.5 次元物質科学研究：原子層物質複合構造体と外場」というタイトルでご講演いただいた。ご講演は、2.5次元物質とは何かから始まり、電子状態を計算する手法（密度汎関数理論（Density Functional Theory (DFT)）、有効遮蔽媒質（Effective Screening Medium (ESM) 法）の簡単な紹介があった。その後、具体的な例として、様々な積層の2層グラフェンや2層遷移金属カルコゲナ

イトの電子状態とその外場による変動に関する研究や、最薄グラファイト層間化合物の物質設計と物性解明に関する研究が紹介された。ここではそのご講演の内容を紹介する。

1.2. 2.5次元物質科学とは何か？

2.5次元物質科学とは、いろいろな2次元物質を集め、重ねたり、捻ったり(ツイスト積層)、隙間を利用(層間化合物)したりすることによって、2次元物質を使った新しい物質科学を展開していこうという試みであると定義されていた。2次元物質は、面内では非常に強固な結合を持っている一方で、面間は van der Waals 力という非常に弱い相互作用を持っている。このことから、2次元物質の組み合わせや重ねる角度を人為的に制御可能で、革新的な物質合成法であり、多種多様な性質を持つ物質の合成が可能となる。

つまり、1+1が2にならない、2次元物質と2次元物質の組み合わせから、それぞれの性質の足し合わせでは説明できない特異な性質が現れる物質系の科学である。なお、このプロジェクトは文部科学省科学研究費助成事業・学術変革領域(A)「2.5次元物質科学：社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト」の支援を受けて行われている。

1.3. 研究例の紹介

1.3.1. 2層グラフェンおよび2層遷移金属カルコゲナイト

2層グラフェンを例にして、同じ2次元物質の重なり方によって、電子状態が異なっていることが紹介された。また、電場の印加や電子の注入に対する応答の違いも示された。同じ2次元物質の重ね合わせであるにもかかわらず、層間の相互作用が弱いため、重なり方や捻り方は無限に存在することによる興味深い現象が見られることが示された。

次に、2層遷移金属カルコゲナイトを例にしたシミュレーションについて紹介された。2層グラファイトとの違いは、重なり方だけでなく、重ねる物質の組み合わせも選択できるようになる(2層 MoS₂や2層 WS₂、あるいは MoS₂+WS₂など)ことである。また、遷移金属カルコゲナイトには、合成は難しいが、構造上の特徴から表裏で原子種が異なる(ヤヌス構造の)層状物質(例えば Se-W-S)を合成することが考えられる。このような物質では、重ね方の自由度がさらに増えることになる。例えば、同じ AB 積層でも Se-W-S/Se-W-S、Se-W-S/S-We-Se、S-W-Se/Se-W-S などが増えることになる。これらの違いによっても、2層膜の電子物性に多様性が生じる。

重ね合わせの自由度が無限にあることから、全てのパターンを合成することは困難であり、また合成そのものが困難な物質もシミュレーションの対象として扱われている。シミュレーションによりユニークな特徴を持った2次元物質の組み合わせや重なり方を見つけることにより、新たな性能を持った物質設計が可能であることが示された。

聴講者から、「ツイスト積層で色々興味深い電子物性が現れる原因は、層間の相互作用の制御で説明できるのか？」という質問があり、「ツイスト積層させ

ることによって現れる長周期構造によるバンドの畳み込みと畳まれたバンド間の相互作用によるもので、モアレの周期が長くなることで、多数のバンドが畳み込まれていくことによる効果であると理解できる」と回答されました。

1.3.2. 最薄グラファイト層間化合物の物質設計と物性解明

重ねられた2次元物質では、その層間にナノ物質(分子やクラスターなど)を挿入することができる。カリウム原子や C₆₀などをグラファイトの層間に挿入したグラファイト層間化合物は有名であり、過去に多くの研究がなされてきた。講演では、極性を持ったカゴ状炭化水素分子のスマネンやコラニユレンを2層グラフェン間に挿入した例が紹介された。挿入した分子の極性(双極子モーメント)の向きに起因する電荷の再分布が起こることが示された。また、挿入した分子の双極子モーメントの大きさに依存して、電荷の移動量を制御できることが示された。さらに、制御は難しいが、極性を持つ挿入分子を配向させる(領域ごとに分子の極性を揃えて挿入する)ことによる面内ヘテロ構造を作成することで、グラフェンの層内に p-n 境界を作り込むことができる例をシミュレーションによって示された。

聴講者から、「層間に分子などを挿入したときに起こる電子物性の変化は、層間の相互作用の変化で説明できるのか？」という質問があり、「様々な可能性があり、グラファイトに K 原子をインターカレーとしたときは、K 原子の価電子が全てグラフェンに移動したことに起因している。今回の講演の例では、分子の極性がグラフェンの Dirac コーンをシフトさせているために起こっていると考えている。」と回答されました。また追加で、「原子や分子を挿入させる系では、単純な電荷移動から軌道混成を伴う相互作用の変化まで、挿入させる物質と挿入位置をコントロールすることで多様な世界が期待できるのではないか」とコメントされました。

1.3.3. WS₂/MoS₂の面内ヘテロ構造

格子定数の近い層状物質(グラフェンと h-BN や WS₂と MoS₂など)は、うまく制御すれば面内でヘテロ構造を持った層状物質を合成できる。そのような面内ヘテロ構造を持つ2次元物質を重ねた2層膜物質が考えられる。具体例として、WS₂と MoS₂からなる原子層膜の2層膜が紹介された。この2層膜は、WS₂/WS₂、WS₂/MoS₂、MoS₂/WS₂、MoS₂/MoS₂のように4種類の重ね合わせの可能性があるが、それぞれの重なり方で異なる電子状態となる。これにより、面内ヘテロ構造を持つ2次元物質の重ね方やキャリア(電子やホール)注入を制御することで0次元系から2次元系まで電子系を制御できることが示された。

1.4. 理論・シミュレーションの醍醐味

1+1が2にならない、すなわち原子層複合構造系の電子物性は、構成要素の単純な代数和を超える非常に多様な性質を示す。この多様性は、原子層間の相互作用が弱いために、2個の原子層物質を選んでもその重ね方が無限にあることに起因している。ただ、

合成することに非常に困難さを伴うことを承知しながら、理論・シミュレーションの醍醐味として、こんな物質ができるかもしれないということを提案することは有意義である。

1.5. 聴講における感想（アドバンスソフト）

2次元物質の重ね合わせにより得られる原子層複合材料の多種・多様な電子物性は、とても興味深いものでした。1+1が2にならない、重ね合わせた2次元複合材料の電子物性が2次元物質の電子物性の単純な重ね合わせではないことを2.5次元と表現されていたが、0.5では表せない無限の可能性のあることは非常に興味深いことであった。

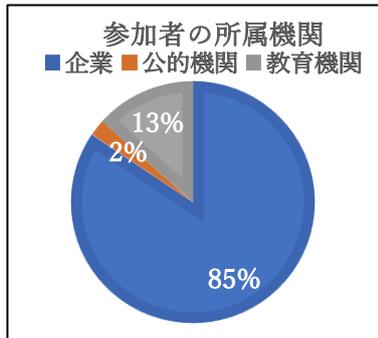
研究のスタンスとしては、応用を意識せず、興味がある現象などを理論・シミュレーションを用いて、物質設計から物性解明を行われていた。ただ、合成が困難であることは認識しながら、出口（応用や実現可能性）を完全に度外視しているわけではないことも理解できた。自分が興味あることを対象にしながら、周りの実験や合成している研究者・技術者とのコミュニケーションが大事であることを示していただいたことは役立つアドバイスであった。

【ご経歴】

1998年 東京工業大学大学院 理工学研究科修了
「博士（理学）」
1998年 筑波大学 物質工学系 助教
2001年 筑波大学 物理学系 講師
2014年 筑波大学 数理物質系 教授

参加者

申込者は83名、当日の参加者は45名であった。参加者の内訳は、企業が38名、公的機関が1名、教育機関が6名であった。主な業種は、「半導体/電子部品」、「材料/素材」、「大学/教育機関」であった。主な職種は、「研究/開発」であった。



参加者のご意見

- 面白い物性や電子状態が、バンド計算から予測できるなどの事が聞けたのが面白かった。
- まとめて原子層材料の計算科学が聞くことができ勉強になりました。
- あまり知らない研究分野で第一原理計算が利用されている事を知ることが出来とても興味深く拝聴致しました。DOSの利用を改めて見直してみたいと思いました。
- 学会のシンポジウム講演のように時間をかけて行ってもらえるので、勉強になりました。

- 2.5次元物質について、様々な状況を想定した解析研究をご紹介いただき、非常に興味深く聴講することができました。

公開資料

今回のご講演のYouTube動画と資料は非公開です。

右のQRコードから過去のアドバンス・シミュレーション・セミナーのYouTube動画をご覧ください。



2023年度の日程を終了して

アドバンス・シミュレーション・セミナー（ASセミナー）2023は、今回の岡田先生のセミナーをもちまして全日程を終了いたしました。ご講演いただいた先生方およびご参加いただいた皆様に感謝申し上げます。

2023年度は4月からセミナーを開催し、ほぼ毎月1回のセミナーを開催してまいりました。本セミナーにご参加いただいた方の内訳については毎回本ニュースで紹介しておりましたように、おおよそ8割が民間企業、2割が国研・大学からの参加者でした。そのうち民間企業からの参加者は三つに分類でき、ほぼ1/3は最先端の研究を担っている若手の方々、1/3は研究を企画されているの方々、残りの1/3は現場で研究をマネジメントされているの方々でした。参加者人数については、毎回のASニュースで報告してまいりましたが、ここにまとめておきます。

No.	申込	当日聴講	No.	申込	当日聴講
第1回	81名	65名	第6回	131名	99名
第2回	87名	71名	第7回	195名	150名
第3回	267名	213名	第8回	75名	55名
第4回	173名	125名	第9回	114名	65名
第5回	88名	63名	第10回	83名	45名

ASセミナー2023では、原子分子のマイクロシミュレーションから流体構造等のマクロシミュレーション、まで、計算科学に関連する幅広いテーマの講演を開催することができました。

来年度におきましても、ASセミナー2024の開催を計画しております。引き続き、最先端の研究を行っている先生方にご講演いただくことを予定しており、本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がる事などを目的としております。開催要領など詳細が決まり次第、ホームページや本ニュースなどでご案内させていただきます。引き続き2024年度のASセミナーをご愛顧賜りたく、よろしくお願い申し上げます。

開催一覧

アドバンス・シミュレーション・セミナー

2023 の開催要領

<https://www.advancesoft.jp/seminar/11637/>

No.	日程 受付状況	内容	テーマ
第1回	4月21日(金) 終了	「 防災・インフラ分野でのシミュレーションへの期待と課題 」 国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 部門長 堀 宗朗 様	防災・インフラ
第2回	5月19日(金) 終了	「 半導体デバイスの歴史と展望 」 IEEE LIFE FELLOW 広島大学 名誉教授 角南 英夫 様	半導体
第3回	6月22日(木) 終了	特別セミナー 「 複雑流動現象の数値シミュレーション 」 大阪大学 基礎工学研究科 機能創成専攻 教授 後藤 晋 様 ----- 「 機械学習による流体解析の拡張 」 University of California, Los Angeles (UCLA) 教授 平 邦彦 様	複雑流動・機械学習
第4回	7月21日(金) 終了	「 GPU スパコンによる混相流シミュレーション・流体構造連成のシミュレーション 」 東京工業大学 学術国際情報センター 教授 青木 尊之 様	流体・HPC
第5回	8月3日(木) 終了	「 原子力安全に必要となる計算科学技術への期待 」 東京大学大学院 工学系研究科 原子力国際専攻 教授 笠原 直人 様	原子力安全
第6回	8月28日(月) 終了	「 サイバー空間の脆弱性と AI：エコーチェンバー、ディープフェイク、ChatGPT の社会的影響 」 東京工業大学 環境・社会理工学院 イノベーション科学系 准教授 笹原 和俊 様	生成 AI
第7回	9月14日(木) 終了	「 量子コンピュータと量子アニーリングマシン：基礎から最先端まで 」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 新原理コンピューティング研究センター 副研究センター長 川畑 史郎 様	量子コンピュータ
第8回	10月6日(金) 終了	「 爆轟から見える CAE の方向性 」 青山学院大学 理工学部 名誉教授 林 光一 様	爆轟
第9回	11月10日(金) 終了	「 都市のデジタルツイン 」 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 デジタルアーキテクチャ研究センター 総括研究主幹 中村 良介 様	デジタルツイン
第10回	12月15日(金) 終了	「 計算物質科学による 2.5 次元物質科学研究：原子層物質複合構造体と外場 」 筑波大学 数理物質系 教授 岡田 晋 様	ナノ

【お問い合わせ先】

アドバンスソフト株式会社 出版事業部

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17階西

TEL : 03-6826-3971 FAX : 03-5283-6580 E-mail : office@advancesoft.jp

<https://www.advancesoft.jp/>

当社では随時人材の募集も行っております。

<https://www.advancesoft.jp/recruit/>